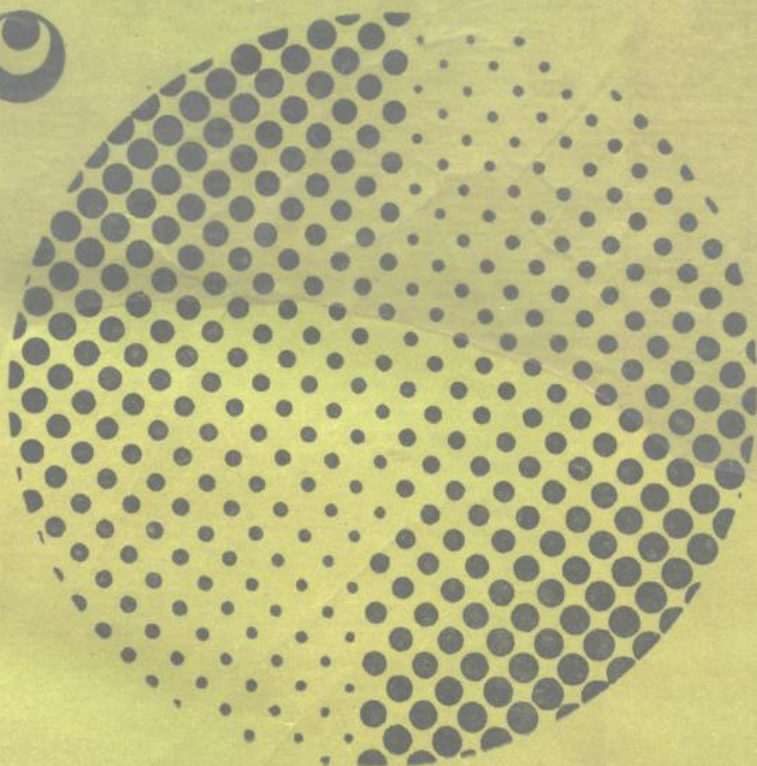


计算物理丛书

计算物理中的谱方法

—— FFT 及其应用

蒋伯诚 周振中 常谦顺等编著



湖南科学技术出版社

计算物理丛书

计算物理中的谱方法

——FFT及其应用

蒋伯诚 周振中 常谦顺等编著

湖南科学技术出版社

计算物理中的谱方法

——FFT及其应用

蒋伯诚 周振中 常谦顺等编著

责任编辑：陈一心

•

湖南科学技术出版社出版发行

(长沙市展览馆路8号)

湖南省新华书店经销 湖南省新华印刷二厂印刷

•

1980年12月第1版第1次印刷

开本：850×1168毫米 1/32 印张：19.5 字数：510,000

印数：1—1,100

ISBN 7—5357—0550—2

TP·20 定价：9.85元

地科89—27

《计算物理丛书》编辑委员会

主 编：秦元勋

副 主 编：况蕙孙 符鸿源

编 委：(按姓氏笔划为序)

王宗皓	王貽仁	付德薰	乔登江	曲钦岳	杜书华
邱希春	况蕙孙	吴声昌	陈一心	孟昭利	胡海清
郝柏林	袁兆鼎	张开明	张锁春	谈庆明	秦元勋
常铁强	曾庆存	黄 敦	符鸿源	蒋伯诚	裴鹿成
虞福春					

名誉编委：(按姓氏笔划为序)

于 敏	王大珩	王淦昌	冯 康	庄逢甘	李德元
何祚庥	谷超豪	周光召	周毓麟	程开甲	彭桓武

编 辑 部：

蒋伯诚	张锁春	杜书华	陈一心	邵富球
-----	-----	-----	-----	-----

总 序 言

计算物理学在中国的发展已有30年的历史。这门学科首先为国防科研作出了重大贡献，现已广泛应用于国民经济建设和基础科学研究。我国的一大批计算物理科学家积累了丰富的实际经验，急需及时地总结、提高、推广和交流。

继1982年成立中国核学会计算物理学会和1984年出版计算物理学报以来，现在开始出版的计算物理学丛书是计算物理学界的又一重大里程碑。

这套丛书的对象是高年级大学生、研究生和广大的科技工作者。内容首先反映中国人自己的成就，并吸收国外的有用经验。有理论，有方法，有算例。既保证高水平的科学体系，又注重解决实际问题。以普及的形式表达专著的内容。

这套丛书的出版得到湖南科技出版社的大力支持。对湖南科技出版社这种着眼于中华民族科技自立的崇高行为，计算物理学工作者都高度赞赏，并表示衷心的感谢。

对于参加这套丛书撰写的科学家、丛书编委会的编委、德高望重的名誉编委和编辑部的工作者所付出的辛勤劳动，我代表中国核学会计算物理学会表示衷心的感谢。

祝计算物理学在为祖国的现代化作出贡献中茁壮成长！

秦元勋

1988年8月8日

说 明

一、本书以汇编形式出版，各章相对独立，难免有符号不够统一和个别内容重复之处。

二、本书编著方案由蒋伯诚、周振中和常谦顺三人共同商定。邀请国内从事谱方法研究的有关学者分头撰写。

绪论由上海科技大学郭本瑜和马和平撰写；

第一章～第五章，谱方法的数值分析，由国防科技大学蒋伯诚、颜宝勇，湖南省计算技术研究所周振中和中国科学院应用数学研究所常谦顺合写；

第六章，FFT在声学中的应用，由南京大学声学研究所余崇智撰写；

第七章，等离子体的粒子模拟，由国防科技大学常文蔚、邵富球和张立夫撰写；

第八章，大气物理中的谱方法，由中国科学院大气物理研究所盛华、张道民和纪立人撰写；

第九章，流体力学中的谱方法，由常谦顺撰写；

第十章，谱方法在地球物理学中的某些应用，由国家地震局地球物理研究所冯锐和张若水撰写；

第十一章，FFT在实验表面物理中的应用，由复旦大学顾昌鑫撰写；

附录，FFT算法程序，由国防科技大学成克懋和蒋伯诚撰写；最后，全书由蒋伯诚统一整理加工后定稿。

三、由于谱方法是近十多年来才发展起来的求解数学物理问题的重要方法，书中素材大部分选自国内外杂志上的论文，有些可能理解得不深；还有许多内容是作者自己的研究成果和心得体会，其中有些观点，尚待进一步探讨，不无商榷之处。作者试图通过

本书的出版，推动谱方法的研究、应用和发展，给有关同行，特别是青年科学计算工作者提供一本可供参考的书籍，起到抛砖引玉的作用。

四、由于作者理论水平有限，对谱方法的计算实践经验不足，又都在教学科研第一线承担着繁重的工作任务，时间匆忙。因此，书中缺点错误在所难免，恳请读者批评指正。

目 录

绪 论

§ 1 谱方法的基本思想与特征	(2)
§ 2 谱方法的进展概况	(9)
§ 3 谱方法的展望	(15)

第一篇 谱方法的数值分析

第一章 谱方法的数学基础	(25)
§ 1 引言	(25)
§ 2 泛函分析的基本概念	(26)
§ 2.1 Banach空间和Hilbert空间	(26)
§ 2.2 算子的概念	(30)
§ 2.3 Sobolev空间	(32)
§ 3 正交函数系	(34)
§ 3.1 正交函数系的基本概念	(34)
§ 3.2 广义Fourier展开	(36)
§ 3.3 Fourier三角级数的性质	(37)
§ 3.4 正交多项式	(43)
§ 3.5 正交多项式的收敛性讨论	(49)
§ 4 带权残量法	(54)
§ 4.1 概述	(54)
§ 4.2 Galerkin方法	(55)
§ 4.3 广义的Galerkin方法	(57)
§ 4.4 配置法	(58)

§ 4.5	子域法.....	(59)
§ 4.6	最小二乘法.....	(60)
§ 4.7	矩量法.....	(61)
§ 4.8	带权残量法的比较.....	(62)
第二章	谱方法的基本原理	(66)
§ 1	引言	(66)
§ 2	谱方法的一般性描述.....	(69)
§ 3	投影算子 P_N 的选择.....	(70)
§ 3.1	Galerkin逼近	(71)
§ 3.2	Tau逼近	(77)
§ 3.3	配置逼近或拟谱逼近.....	(80)
§ 3.4	Galerkin逼近、Tau逼近和拟谱逼近之间的差别	(83)
§ 4	近似空间 $\mathcal{S}_N$ 的选择.....	(87)
§ 4.1	Fourier级数	(88)
§ 4.2	Chebyshev级数	(93)
§ 4.3	Sturm-Liouville问题的特征函数	(95)
§ 5	时间差分	(100)
§ 5.1	隐式时间积分方法.....	(101)
§ 5.2	Fourier级数谱逼近的时间积分方法	(101)
§ 5.3	混合初边值问题的时间差分.....	(103)
§ 5.4	半隐式方法.....	(103)
§ 6	谱元方法和谱多重网格法	(105)
§ 6.1	谱元方法.....	(105)
§ 6.2	谱多重网格法.....	(109)
第三章	谱方法的定性分析	(119)
§ 1	代数稳定性及其应用.....	(119)
§ 1.1	代数稳定性的定义.....	(119)
§ 1.2	一些简单的模型问题的代数稳定性.....	(127)
§ 2	全离散格式的稳定性与收敛性	(140)
§ 2.1	隐式时间积分方法的稳定性.....	(142)
§ 2.2	Fourier级数谱逼近的稳定性	(143)
§ 2.3	混合初边值问题的时间差分格式的稳定性.....	(145)

§ 2.4	半隐式方法的稳定性	(149)
* § 3	实际问题的谱逼近的定性分析	(150)
§ 3.1	Захаров方程周期初值问题的谱方法	(150)
§ 3.2	一类高阶非线性拟抛物方程组的Chebyshev谱方法	(165)
§ 4	边界条件的影响、能量守恒性质	(178)
§ 4.1	边界条件对谱方法稳定性的影响	(178)
§ 4.2	谱方法的能量守恒性质	(179)
§ 5	谱方法的优点与谱方法的选择	(181)
§ 5.1	谱方法的优点	(181)
§ 5.2	应用于具体问题时代谱方法的选择	(182)
第四章	谱方法的有效实现——FFT算法	(186)
§ 1	Fourier变换	(186)
§ 1.1	Fourier变换的定义	(186)
§ 1.2	Fourier变换的性质	(187)
§ 2	离散Fourier变换的快速算法	(189)
§ 2.1	基2FFT算法	(189)
§ 2.2	基2FFT的并行计算	(191)
§ 2.3	任意因子FFT的并行计算	(196)
§ 2.4	多道FFT的并行计算	(200)
§ 2.5	实数据的FFT算法及其并行计算	(205)
§ 3	二维快速Fourier变换	(209)
§ 3.1	行列算法	(209)
§ 3.2	长向量算法	(210)
§ 3.3	多道算法	(215)
§ 4	Fourier拟谱法	(216)
§ 4.1	精确空间导数法	(216)
§ 4.2	拟谱法	(217)
§ 4.3	分步拟谱法	(219)
第五章	非线性发展方程的拟谱解法	(222)
§ 1	引言	(222)
§ 2	非线性计算的耗散和色散效应	(224)
§ 2.1	物理耗散和色散	(224)

§ 2.2 数值耗散和色散	(226)
§ 2.3 非线性计算的耗散和色散效应	(230)
§ 3 非线性发展方程的拟谱解法	(233)
§ 3.1 Burgers方程	(233)
§ 3.2 Kdv方程	(235)
§ 3.3 Kdv-Burgers方程	(240)
§ 3.4 RLW方程	(242)
§ 3.5 非线性Schrödinger方程	(245)
§ 4 拟谱法的滤波和光滑化技术	(249)

第二篇 谱方法的应用

第六章 FFT在声学中的应用	(253)
§ 1 引言	(253)
§ 2 倒谱和细化FFT	(259)
§ 2.1 倒谱分析	(259)
§ 2.2 细化FFT	(263)
§ 3 FFT在声学测量中的应用	(268)
§ 3.1 测量方法	(269)
§ 3.2 几个测量问题的讨论	(272)
§ 4 FFT在语言信号处理中的应用	(273)
§ 4.1 语言的产生	(273)
§ 4.2 短时间频谱分析	(275)
§ 4.3 声调分析	(280)
§ 4.4 语音频谱分析	(283)
§ 4.5 言语增强处理	(285)

第七章 等离子体的粒子模拟	(288)
---------------------	-------

§ 1 粒子模拟模型和数值稳定性	(289)
§ 1.1 静电模型	(289)
§ 1.2 电磁模型	(309)
§ 1.3 静磁模型	(314)
§ 1.4 数值稳定性	(315)
§ 2 诊断	(318)

§ 2.1	粒子运动的测量	(318)
§ 2.2	波的测量	(319)
§ 3	粒子初始状态的安置	(321)
§ 3.1	系统的噪声启动	(321)
§ 3.2	系统的平静启动	(324)
§ 4	自由电子激光的粒子模拟	(326)
§ 4.1	自由电子激光的理论分析	(326)
§ 4.2	自由电子激光粒子模拟程序的建立和检验	(331)
§ 4.3	模拟结果及讨论	(346)
第八章	大气物理中的谱方法	(361)
§ 1	谱方法在资料分析中的应用	(361)
§ 1.1	自相关与功率谱	(361)
§ 1.2	互相关与交叉谱	(369)
§ 1.3	空间序列的谱分析	(374)
§ 1.4	经验正交函数分解(EOF)	(378)
§ 2	谱方法在数值天气预报和数值模拟上的应用	(384)
§ 2.1	引言	(384)
§ 2.2	基本原则	(385)
§ 2.3	预报模式的时间积分	(387)
§ 2.4	高斯积分和高斯纬圈	(404)
§ 2.5	谱模式中的地形处理	(407)
§ 2.6	谱方法在初值处理上的应用	(412)
第九章	流体力学中的谱方法	(418)
§ 1	引言	(418)
§ 1.1	基本方程	(418)
§ 1.2	时间差分	(419)
§ 1.3	Chebyshev展开式导数的计算	(422)
§ 1.4	滤波处理	(425)
§ 2	Burgers方程的谱方法	(429)
§ 3	Stokes方程的谱方法	(432)
§ 3.1	一种不稳定的Chebyshev- τ 方法近似	(432)
§ 3.2	稳定的Chebyshev- τ 近似	(434)

§ 3.3 原始变量Stokes方程组的分数步法	(436)
§ 4 不可压无粘流的谱方法	(439)
§ 4.1 完全用谱方法的解法	(440)
§ 4.2 部分用谱方法的解法	(442)
§ 4.3 计算结果	(444)
§ 5 不可压Navier-Stokes方程的拟谱方法	(445)
§ 5.1 显式格式的不收敛性	(445)
§ 5.2 利用分裂格式的拟谱法	(448)
§ 5.3 隐式格式的Fourier-Chebyshev级数的拟谱法	(452)
§ 5.4 平板问题计算的拟谱法	(457)
§ 6 无粘可压缩流的拟谱方法	(458)
§ 6.1 问题的空间离散法	(458)
§ 6.2 时间差分	(459)
§ 6.3 模型问题和计算结果	(460)
第十章 谱方法在地球物理学中的某些应用	(465)
§ 1 信号的提取与基本处理	(465)
§ 1.1 地球物理信号的特点	(465)
§ 1.2 天然滤波作用	(468)
§ 1.3 人工滤波作用	(473)
§ 1.4 反滤波的应用	(479)
§ 2 地球内部构造的谱研究	(484)
§ 2.1 地震学方法	(484)
§ 2.2 重磁方法	(494)
§ 3 震源特性的谱研究	(504)
§ 3.1 震源机制	(504)
§ 3.2 地震震级和震源深度	(513)
§ 3.3 人工震源与核监测	(518)
第十一章 FFT在实验表面物理中的应用	(523)
§ 1 表面电子能谱的数据处理	(524)
§ 1.1 表面电子能谱数据的预处理	(526)
§ 1.2 X光电子谱的数据处理	(530)
§ 1.3 俄歇电子谱的数据处理	(538)

§ 2 广延X射线吸收精细结构的数据处理	(550)
§ 2.1 EXAFS基本原理	(551)
§ 2.2 EXAFS数据处理	(555)
 附录 FFT算法程序	 (569)
一、标量FFT算法程序	(569)
二、向量FFT算法程序	(586)

绪 论

近十多年,谱方法蓬勃地发展起来。它为数值求解微分方程提供了又一个强有力的工具。谱方法已被用于求解各种实际问题,例如,大气环流问题,海流问题,数值湍流模拟,以及孤立子的计算和研究等等,其数值分析理论也在不断发展和完善。可以说,谱方法已和有限差分法及有限元素法一起成为偏微分方程数值解的三大基本方法,已发展成为计算物理中的一类重要方法。

谱方法的来源是经典的Ritz-Galerkin方法,以整体无限光滑的函数系(例如,三角多项式、Chebyshev多项式、Jacobi多项式和Legendre多项式等,它们都是Sturm-Liouville问题的谱函数)作为基底的Galerkin方法和配置法,分别称为谱方法和拟谱方法,统称为谱方法。

谱方法的基本思想是古老的,它之所以只在近年来才重新引起人们的广泛注意,主要原因是由于快速Fourier变换(FFT)的出现和应用,大大减少了谱方法的计算量,使其有了实用价值。

谱方法最为诱人之处是它具有“无穷阶”的收敛速度,也就是说,假如原微分方程的解无限可微,则由适当的谱方法所得到的近似解对原问题解的收敛速度比 N^{-1} 的任何幂次都更快,这里 N 是所取基函数的个数。而有限差分法的逼近精度则受到格式本身的限制;对于有限元法,其精度也要受到取作基函数的多项式的次数的限制。近来发展的 P -version有限元法对此有所突破,它固定网格,而通过增加单元的度数来得到收敛性。这一点同谱方法相类似。但是谱方法的精度能随微分方程解的光滑程度的提高

而自动提高。因此,谱方法日益受到重视,众多的数值试验与应用报告证实了谱方法的有效性,即对谱方法可以适用的情况,它往往给出更好的结果。

§1 谱方法的基本思想与特征

一、谱方法的基本思想 谱方法的由来已久。早在1820年, Navier就提出了四边铰链支承的长方薄板问题的重三角级数解法。我们用一个简单的例子来说明谱方法的基本思想。

例1 热传导方程的Fourier-sine谱方法

考虑抛物型方程初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, & 0 < x < \pi, t \geq 0, \\ u(0,t) = u(\pi,t) = 0, & t > 0, \\ u(x,0) = f(x), & 0 \leq x \leq \pi. \end{cases} \quad (1.1)$$

方程(1.1)的解为

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \sin nx, \quad (1.2)$$

代入方程后得到关于系数 $a_n(t)$ 的常微分方程组

$$\begin{cases} \frac{da_n(t)}{dt} = -n^2 a_n(t), & n = 1, 2, \dots, \\ a_n(0) = f_n, & n = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (1.3)$$

其中

$$f_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi f(x) \sin nx dx,$$

它是初值 $f(x)$ 的Fourier-sine级数展开式系数。我们假设 $f(x)$ 适当光滑,例如 $f(x) \in C_0(0, \pi)$ 。现在将(1.2)和(1.3)式截断到第 N 项,近似解记为 u_N ,即得到(1.1)的Fourier-sine谱逼近

$$u_N(x,t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \sin nx, \quad (1.4)$$

$$\begin{cases} \frac{da_n(t)}{dt} = -n^2 a_n(t), & n=1,2,\dots,N, \\ a_n(0) = f_n, & n=1,2,\dots,N, \end{cases} \quad (1.5)$$

容易求出 $a_n(t) = f_n e^{-n^2 t}$, 因此得到

$$|u(x, t) - u_N(x, t)| = O(e^{-N^2 t}), \quad N \rightarrow \infty, \quad t > 0$$

由上可见, 谱方法解题过程包括两个步骤。第一步是选取基函数 (通常要求它们满足边界条件。若不满足边值条件, 则将导出称为Tau逼近的方法), 并由此确定近似解 u_N 所属的逼近空间 V_N 。在上面例子中, 基函数取为 $\{\sin nx\} (n=1, 2, \dots, N)$, 而 $V_N = \text{Span}\{\sin nx | 1 \leq n \leq N\}$ 。显然, $\{\sin nx\}$ 是用分离变量法求解问题 (1.1) 时导出关于变量 x 的特征值问题的谱函数。但对于一般的问题, 要求出相应的谱函数是十分困难的。即使能够求出谱函数, 也还可能存在按其展开收敛速度太慢、运算量太大及计算不够稳定等问题。因此, 在目前谱方法基本上不考虑和求解问题相联系的谱函数, 而总是采用逼近性质良好、且便于利用快速变换来计算的三角多项式和Chebyshev多项式等作为基函数。

求解的第二步是如何将无限维问题简化为有限维问题。假设在一个Hilbert空间 H 中考虑原问题, 则上面所用的截断方法实际上就是定义了一个从 $H \rightarrow V_N$ 的Galerkin投影算子 P_N , 然后要求方程两端在 V_N 中的投影相等。事实上在Galerkin方程

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial u_N(t)}{\partial t}, \varphi \right) = \left(\frac{\partial^2 u_N(t)}{\partial x^2}, \varphi \right), & \forall \varphi \in V_N, \\ (u_N(0), \varphi) = (f, \varphi) & \forall \varphi \in V_N \end{cases} \quad (1.6)$$

中用(1.4)式代入, 即导出谱逼近方程(1.5)。需要说明的是, 本例中的微分算子不是自伴的, 因此不存在自然的极小能量原理。所以我们不把上述方法同Ritz法相联系。对于具有极小能量原理的问题, 例如上面提到的长方薄板问题, 完全可用Ritz方法从求泛函的极小出发来导出上述逼近。这同有限元法中的有关情况相类似。

我们发现, 为了求出 f_n 必须借助于数值积分。如果方程中有右